

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

بررسی توابع همبسته مستقیم و محاسبه خواص ترمودینامیکی و کشسانی
بلورهای مایع با مولکولهای بیضی گون

بوسیله:

۱۳۸۲ / ۴ / ۲۰

محمد حسین شمس

پایان نامه

ارائه شده به معاونت تحصیلات تکمیلی به عنوان بخشی از
فعالیت‌های تحصیلی لازم برای اخذ درجه کارشناسی ارشد

وزارت آموزش عالی
جمهوری اسلامی ایران

در رشته:

فیزیک

از

دانشگاه شیراز

شیراز

جمهوری اسلامی ایران

ارزیابی و تصویب شده توسط کمیته پایان نامه با درجه: عالی

امضاء اعضاء کمیته پایان نامه:

..... دکنر محمود مرادی، دانشیار بخش فیزیک (رئیس کمیته)

..... دکنر محمود براتی خواجویی، استاد بخش فیزیک

..... دکنر محمد مهدی گلشن، استادیار بخش فیزیک

..... دکنر نادر قهرمانی، دانشیار بخش فیزیک

..... دکنر عبدالناصر ذاکری، استادیار بخش فیزیک

دی ماه ۱۳۸۱

۴۸۷۸

تقدیم به

روح پاک مادر عزیزم که مهربانی و فداکاری را از او آموختم و عشق او در دلم همیشه جاودانی است.

پدر بزرگوام که عشق و صداقت را از او آموختم.

همسر مهربانم که چون کوهی محکم و استوار با توکل به خدا در مقابل مشکلات پایداری کرد و در این مسیر همواره یاریم نمود و همیشه مدیون مهربانیها و محبت‌های او هستم.

برادران و خواهرم که همواره پشتیبان و مشوقم بودند.

و همه کسانی که به من درس زندگی آموختند.

سپاسگزاری

اکنون که به یاری پرودگار، این پایان نامه را به انجام رسانده‌ام، لازم می‌دانم از استاد گرامیم جناب آقای دکتر محمود مرادی که از راهنمائیهای بی‌دریغ ایشان بسیار بهره‌مند شدم و نیز از اساتید محترم آقای دکتر محمود براتی خواجهویی، آقای دکتر محمد مهدی گلشن، آقای دکتر نادر قهرمانی و آقای دکتر عبدالناصر ذاکری که از نظرات ارزشمندشان استفاده کرده‌ام تشکر و سپاسگزاری نموده و زندگانی همراه با پیروزی و کامیابی برایشان آرزو نمایم.

در پایان از جناب آقای دکتر محمد حسین دهقانی، نماینده محترم تحصیلات تکمیلی در جلسه پایان نامه صمیمانه تشکر می‌نمایم.

چکیده

بررسی توابع همبسته مستقیم و محاسبه خواص ترمودینامیکی و کشسانی بلورهای مایع با مولکولهای بیضی گون

بوسیله‌ی

محمد حسین شمس

دسته‌ای از مواد که خصوصیاتشان حدواسط بین جامد بلوری و مایع می باشد، بلورهای مایع نام دارند. این مواد مانند مایعات جاری می شوند در حالی که هنوز بعضی از مشخصات فیزیکی بلورها را دارا هستند، انواع مختلفی از فازهای بلور مایع وجود دارند که آنها را براساس ترتیب مولکولهایشان که در ساختار فاز شرکت دارند تقسیم بندی می کنند. با توجه به دما، ذرات تشکیل دهنده، و دیگر خصوصیت های فیزیکی این بلورها می توانند در حالت ایزوتروپیک، نماتیک، سمکتیک و غیره قرار گیرند.

در اینجا به بررسی خصوصیات مولکولهای بیضی گون در فاز نماتیک می پردازیم و تابع همبسته مستقیم در فاز نماتیک را به کمک روش اختلال و با استفاده از تابع همبسته مستقیم مدل کره سخت محاسبه کرده و با استفاده از آن ثابت های الاستیک را بدست می آوریم، سپس با استفاده از تقریب چگالی کم و استفاده از پتانسیل گی - برن تابع همبسته مستقیم دیگری را محاسبه کرده و ثابت های الاستیک را از این روش نیز محاسبه خواهیم کرد و با یکدیگر مقایسه می کنیم.

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
..... ۵	فهرست مطالب
..... ۶	فهرست اشکال و نمودارها
..... ۷	فهرست جدولها

فصل اول: مقدمه

..... ۲	مقدمه
..... ۲	۱-۱- مقدمه
..... ۳	۲-۱- بلورهای مایع

فصل دوم: نظریه مایعات ساده - بلورهای مایع

..... ۵	۱-۲- مقدمه
..... ۵	۲-۲- نظریه مایعات ساده
..... ۵	۱-۲-۲- معادله حالت و فاز مایعات
..... ۱۰	۲-۲-۲- دسته بندی مایعات و نیروهای بین مولکولی
..... ۱۰	۳-۲-۲- مدل کره سخت
..... ۱۱۱	۴-۲-۲- چاه پتانسیل مربعی
..... ۱۱	۵-۲-۲- چاه پتانسیل مثلثی
..... ۱۲	۶-۲-۲- پتانسیل لnard جونز

- ۱۳-۲-۷- مدل مایع کره سخت حامل دو قطبی در مرکز (مایع قطبی)..... ۱۳
- ۱۳-۲-۳- بلورهای مایع..... ۱۳
- ۱۳-۲-۱- مقدمه..... ۱۳
- ۱۵-۲-۳- فاز نماتیک..... ۱۵
- ۱۷-۲-۳-۳- فاز سمکتیک..... ۱۷
- ۱۹-۲-۳-۴- بلورهای مایع دیسک وار..... ۱۹
- ۱۹-۲-۳-۵- پارامترهای اصلی در فازهای بلور مایع..... ۱۹

فصل سوم : بررسی توابع همبسته مستقیم و نظریه تابعی چگالی

- ۲۲-۱-۳- مقدمه..... ۲۲
- ۲۳-۲-۳- توابع همبسته..... ۲۳
- ۲۴-۳-۳- توابع توزیع..... ۲۴
- ۲۵-۱-۳-۳- تابع توزیع تک ذره ای..... ۲۵
- ۲۷-۲-۳-۳- تابع توزیع دو ذره ای..... ۲۷
- ۲۸-۴-۳- تابع همبسته کل و تابع همبسته دوتایی..... ۲۸
- ۲۹-۵-۳- تابع همبسته مستقیم..... ۲۹
- ۳۰-۱-۵-۳- نظریه تابعی چگالی مولکولی..... ۳۰
- ۳۲-۲-۵-۳- نظریه تابعی چگالی در وضعیت نماتیک..... ۳۲
- ۳۵-۳-۵-۳- تقارن توابع همبسته..... ۳۵

فصل چهارم : ثابت های الاستیک فرانک

- ۳۸-۱-۴- مقدمه..... ۳۸
- ۳۸-۲-۴- توصیف نظری ثابت های الاستیک..... ۳۸
- ۴۲-۳-۴- نظریه های ثابت های الاستیک در فاز نماتیک..... ۴۲
- ۴۲-۱-۳-۴- نظریه لاندائو - جینس..... ۴۲
- ۴۲-۲-۳-۴- نظریه میدان متوسط و ذرات سخت..... ۴۲

۴۳ نظریه واندروالس	۳-۳-۴
۴۴ نظریه تابعی چگالی ثابت های الاستیک	۴-۳-۴
۴۸ بسط توابع همبسته بر حسب سری ها	۴-۴
۵۴ ناوردایی دورانی بسط	۱-۴-۴
۵۴ بسط تابع توزیع یک ذره ای	۲-۴-۴
۵۲ بسط تابع توزیع دو ذره ای	۳-۴-۴
۵۳ بسط تابع همبسته کل	۴-۴-۴
۵۳ بسط تابع همبسته مستقیم	۵-۴-۴

فصل پنجم : بررسی پتانسیل بین مولکولی و تابع همبسته مستقیم و محاسبه

ثابت های الاستیک فرانک برای مولکولهای بیضی گون

۵۶ مقدمه	۱-۵
۵۶ پتانسیل گی _ برن	۲-۵
۵۹ تابع همبسته مستقیم مولکولهای بیضی گون	۳-۵
۶۳ تابع توزیع یک ذره در فاز نماتیک	۴-۵
۶۵ محاسبه ثابت های الاستیک	۵-۵

فصل ششم : بحث و نتیجه گیری

۸۴ بحث و نتیجه گیری	۱-۶
----	------------------------	-----

۸۷ مراجع	
----	-------------	--

فهرست جداول

صفحه

عنوان

جدول ۱-۵: ثابت‌های الاستیک بر حسب چگالی ρ_0 در دمای ثابت ۶۸

جدول ۲-۵: ثابت‌های الاستیک بر حسب دما $(\beta\varepsilon)$ در دمای ثابت ۶۸

فهرست شکل‌ها

صفحه	عنوان
۱۱	شکل ۱-۲: تصویر معادله حالت در صفحه (P-T).....
۱۱	شکل ۲-۲: پتانسیل مدل کره سخت.....
۱۲	شکل ۳-۲: چاه پتانسیل مثلثی.....
۱۲	شکل ۴-۲: پتانسیل لناردجونز.....
۱۶	شکل ۵-۲: فازهای نماتیک بلور مایع.....
۱۷	شکل ۶-۲: تقارن فضایی فاز نماتیک تک محور.....
۱۸	شکل ۷-۲: بلور مایع در حالت سمکتیک.....
۱۸	شکل ۸-۲: تقارن فضایی فاز سمکتیک C.....
۱۹	شکل ۹-۲: بلورهای مایع فاز دیسک وار.....
۲۹	شکل ۱-۳: تأثیر مستقیم و غیر مستقیم ذره ۱ روی ذره ۲.....
۳۵	شکل ۲-۳: اختلاف بین تابع همبسته کل و تابع همبسته مستقیم.....
۳۹	شکل ۱-۴: ساختار نماتیک.....
۴۰	شکل ۲-۴: تغییر شکل‌های فاز نماتیک.....
۴۸	شکل ۳-۴: دستگاه مختصات راستار.....
۵۰	شکل ۴-۴: دستگاه مختصات مولکولی.....

- شکل ۴-۵: نماتیک شامل مولکول بیضی گون ۵۲
- شکل ۵-۱: وضعیت قرار گرفتن دو مولکول بیضی گون..... ۵۸
- شکل ۵-۲: رسم پتانسیل گی برن در حالت Side-to-Side ۶۹
- شکل ۵-۳: رسم پتانسیل گی برن در حالت Side-to-Side ۷۰
- شکل ۵-۴: رسم پتانسیل گی برن برای حالت End-to-End ۷۱
- شکل ۵-۵: رسم تابع توزیع زاویه‌ای به ازای $\gamma=2$ ۷۲
- شکل ۵-۶: رسم تابع توزیع زاویه‌ای به ازای $\gamma=5$ ۷۳
- شکل ۵-۷: رسم تابع همبسته مستقیم در حالت Side-by-Side به ازای $\beta\varepsilon=1$ ۷۴
- شکل ۵-۸: رسم تابع همبسته مستقیم در حالت Side-by-Side به ازای $\beta\varepsilon=5$ ۷۵
- شکل ۵-۹: رسم تابع همبسته مستقیم در حالت End-to-Side به ازای $\beta\varepsilon=1$ ۷۶
- شکل ۵-۱۰: رسم تابع همبسته مستقیم در حالت End-to-Side به ازای $\beta\varepsilon=5$ ۷۷
- شکل ۵-۱۱: رسم تابع همبسته مستقیم در حالت End-to-End به ازای $\beta\varepsilon=1$ ۷۸
- شکل ۵-۱۲: رسم تابع همبسته مستقیم در حالت End-to-End به ازای $\beta\varepsilon=5$ ۷۹
- شکل ۵-۱۳: رسم ثابت الاستیک k_{11} بر حسب $\beta\varepsilon$ ۸۰
- شکل ۵-۱۴: رسم ثابت الاستیک k_{22} بر حسب $\beta\varepsilon$ ۸۱
- شکل ۵-۱۵: رسم ثابت الاستیک k_{33} بر حسب $\beta\varepsilon$ ۸۲

فصل اول

مقدمه

۱- مقدمه

۱-۱- مقدمه

در چند دهه اخیر نظریه تابعی چگالی کمک بزرگی به حل مسائل مربوط به نظریه مایعات منجمله خواص استاتیکی و دینامیکی آنها نموده است [۱]. امروزه این نظریه هم بصورت کوانتومی و هم بصورت کلاسیکی مورد استفاده زیادی در بررسی و مطالعه مواد چگال دارد. پیشرفت قابل توجه در نظریه مایعات مدیون نظریه تابعی چگالی [۲] میباشد. این نظریه به نوبه خود باعث حل خیلی از مسائل مربوط به مایعات غیر همگن شده است [۳].

در سال های اخیر نیز سعی زیادی در استفاده از نظریه تابعی چگالی در بررسی ساختار و خواص ترمودینامیکی جامدات شده است [۴]. دلیل عمده این است که نظریه تابعی یک نظریه فراگیر بوده و بطور عمده در قالب ریاضی مطرح است و در آن واحد قادر است همه حالات مواد منجمله مایع - جامد - گاز را مورد بررسی قرار دهد.

همچنین نظریه تابعی چگالی می تواند به عنوان یک ابزار میکروسکوپی مورد استفاده قرار گیرد که به کمک مکانیک آماری قابل بحث و بررسی است و می توان به کمک آن خواص ترمودینامیکی و ساختاری سیستم مورد نظر را بدست آوریم. این اصل اساسی که هر سیستمی سعی می کند در حالت تعادل به کمترین مقدار انرژی دست یابد پایه و اساس این نظریه را تشکیل می دهد. بر این اساس انرژی آزاد سیستم را بصورت تابعی چگالی آن نوشته و سپس نسبت به

چگالی کمینه نموده آنگاه چگالی را با حل معادلات مربوط محاسبه می کنیم و در نتیجه به کمک این چگالی تعادلی دیگر خواص ترمودینامیکی سیستم قابل محاسبه خواهد بود [۵].

ایده اصلی و اساسی نظریه تابعی چگالی تقریباً به اندازه مکانیک کوانتومی عمر دارد. اثبات این ایده در سال ۱۹۶۴ بوسیله هو هنببرگ (Hohenberg) و کوهن (Kohn) انجام شد [۶].

همچنین کارهای با اهمیت تری بوسیله کوهن و شام (Sham) انجام شد [۷].

معادلات کوهن و شام بعنوان نقطه شروع روشهای تابعی جدید شناخته می شود [۹و۸].

با نظریه تابعی چگالی می توان انرژی آزاد حالات مختلف مواد خصوصاً در حال تعادل را محاسبه کرد. چنین محاسباتی را برای شبه بلورها [۱۰] و شیشه ها [۱۱] نیز می توان مورد استفاده قرارداد. و امکان در نظر گرفتن هر گونه بر همکنش بین مولکولها امکان پذیر می باشد. به همین دلیل امروزه انواع مختلف مواد با بر هم کنشهای بین مولکولی و مولکولهای با اشکال متفاوت مورد بحث و بررسی قرار می گیرند، در این پایان نامه هدف بررسی ساختار و خواص فیزیکی بلورهای مایع به کمک نظریه تابعی چگالی است. اصولاً بلورهای مایع دارای مولکولهای با اشکال غیرکروی، مثل میله ای شکل و غیره می باشند و خواصی مشابه مایع و جامد داشته و از جهاتی شبیه مایع و از جهاتی شبیه جامد عمل می کنند.

۱-۲- بلورهای مایع

اصولاً در فیزیک مواد را به سه دسته جامد - مایع - گاز دسته بندی می کنند در حالی که حالتی میانی بین این سه حالت نیز وجود دارد. بنظر می رسد که این تقسیم بندی فراگیر نمی باشد بخصوص در مورد مواد آلی که تبدیل از حالت جامد به مایع به صورت یک گذار معمولی و یکباره انجام نمی شود و شامل یک مرحله میانی است. خواص مکانیکی و تقارنی این فازها حد واسط بین حالت مایع و حالت بلوری آنهاست، به همین دلیل آنها را معمولاً "بلورهای مایع"

می‌نامند. نام مناسب تر برای آنها فاز های مزومورفیک (Mesomorphic) که به معنی حد واسط می باشد نیز به کار می رود.

برای شناخت بیشتر بلورهای مایع بهتر است اول تفاوت بین مایع و بلور را بشناسیم. در بلور، ترکیبات سازنده (مولکولها یا گروه مولکولها) بصورت توده های منظم هستند که مرکز ثقل گروه‌ها روی شبکه سه بعدی قرار دارند. اما در مایعات، مراکز ثقل به مفهوم کلی بصورت نامنظم می باشند و موقعیت اتمها یا مولکولها در مایعات دائما "در حال حرکت می باشند که در محاسبات از یک متوسط گیری استفاده می‌شود. پس دسته ای از مواد که خصوصیتشان حد واسط بلور و مایع می باشد را بلور مایع گویند. این مواد مانند مایعات جاری می شوند، اما بعضی از مشخصه های فیزیکی بلورها را دارا هستند. انواع مختلفی از فازهای بلور مایع وجود دارند که آنها را بر اساس ترتیب و جهت قرار گرفتن مولکولهایشان که در ساختار فاز شرکت دارند تقسیم‌بندی می کنند، این مواد می توانند در حالت‌های ایزوتروپیک (Isotropic)، نماتیک (Nematic) کلستریک (Colestic)، سمکتیک (Smectic) قرار گیرند [۱۲].

امروزه شناسایی بلور مایع و دیگر مزو فازها یک امر مهم می باشد، زیرا بلورهای مایع کاربرد وسیعی در صنعت و تکنولوژی امروز پیدا کرده است. تمام فازهای بلورهای مایع از لحاظ کاربردی حائز اهمیت می باشند و علت این امر این است که هر کدام از فازها خواص جالب مخصوص به خود را دارند، زیرا خواص فیزیکی و نوری جالبی از خود نشان می دهند. از بین حالت‌های ذکر شده در بالا حالت نماتیک از لحاظ فناوری از همه مهمتر است. عمده بلورهای مایع به کار رفته امروزی در فاز نماتیک می باشند. با توجه به اینکه بلورهای مایع مورد نظر در اینجا از مولکولهای میله ای شکل تشکیل شده اند. در حالت نماتیک توزیع کاتوره ای مراکز مولکولها در شرایط ساده هندسی کاملاً شبیه مایعات معمولی است در حالیکه درجه محلی از جهت های ترجیحی این مولکولها را بوسیله راستار $\vec{n}(\vec{r})$ و یا یک میدان برداری یکه نمایش داده می شود که در هر نقطه موازی جهت غالب است و می تواند از نقطه ای به نقطه ای دیگر تغییر کند.